

刻み幅自動調節の考察と実験例

東大 工 小 林 光 夫

まえがき

常微分方程式を数値的に解く際に、微分方程式を近似する差分方程式を作りそれを解くいわゆる差分近似解法は、実用的な見地から極めて有効な解法であり、かなりまとまった研究がなされてきている（例之は^{*}[1], [2]など）。しかるに、独立変数の離散的な値を一定の間隔（刻み幅）でとる通常の解法では、刻み幅の適切な大きさを決定することが非常に難しい問題であり、このことに起因すると考えられる各種の困難が指摘された[3]。これに対し、これらの困難をもつ難問を色々な方向から解決しようとする試みがとられたが[4]、その中で、計算途中での誤差に関する情報によって刻み幅を自動的に調節しつつ積分を進める「刻み幅の自動調節」は、微分方程式の性格が未知の場合に、かなり有効な解法であると考えられる。ここでは、いわゆる台形公式に刻み幅の自動調節を応用した TRAM^{*} (Trapezoidal Rule with Automatic Mod-

^{*} 東京大学の森口繁一教授の命名による。「刻み幅自動調節台形則」の意味であるが、以後 TRAM と略称する。

ification) を中心とし, 刻み幅の自動調節に関する多少の理論的考察といくつかの数値実験例を示す.

1. TRAM

この解法は, 予測子に中点則, 修正子に台形則を用いた積分公式で, 修正子の局所打ち切り誤差の見積りを行ない, それが常にある範囲内に収まるように刻み幅を制御する方法である.

a, η を定数, f を x, y の十分滑らかな函数として

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y), & x \geq a \\ y(a) = \eta \end{cases} \quad (1.1)$$

という常微分方程式の初期値問題が与えられたとする. 刻み幅を $h > 0$ とし, 独立変数 x の分点 x_n を

$$\begin{cases} x_0 = a \\ x_{n+1} = x_n + h \quad (n=0, 1, \dots) \end{cases} \quad (1.2)$$

によって定め, 分点 x_n における未知函数の値 $y(x_n)$ を近似する数値解 y_n を

$$\begin{cases} \text{予測子: } z_n = y_{n-2} + 2h f(x_{n-1}, y_{n-1}) \end{cases} \quad (1.3)$$

$$\begin{cases} \text{修正子: } y_n = y_{n-1} + \frac{1}{2}h \{f(x_n, z_n) + f(x_{n-1}, y_{n-1})\} \end{cases} \quad (1.4)$$

によって, 次々に定めゆくのがいわゆる台形公式である.

この公式によれば, 修正値 y_n と予測値 z_n の差 (修正量)

$$D_n \equiv y_n - z_n \quad (1.5)$$

によって、修正子 (1.4) の局所打ち切誤差 T_c を

$$T_c \approx -\frac{1}{6} D_n \quad (1.6)$$

として見積りすることが出来る [5]。各分点における D_n を観測して刻み幅を制御することになれば、 T_c が常にある範囲内に収まるよう出来るであろう。すなわち、 $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ ($\varepsilon_2 < \varepsilon_1$) を正の定数とし、 $\varepsilon_2 \leq |D_n| \leq \varepsilon_1$ のときは同じ刻み幅のまま積分を進め、 $\varepsilon_1 < |D_n|$ のときは刻み幅を半分にし、 $|D_n| < \varepsilon_2$ のときは刻み幅を2倍にするように制御を行なえば、常に

$$\varepsilon' \leq |T_c| \leq \varepsilon \quad (1.7)$$

とできる。ここには $\varepsilon = \frac{1}{6} \varepsilon_1$ 、 $\varepsilon' = \frac{1}{6} \varepsilon_2$ である。い、(7) の局所打ち切誤差 T_c について、局所的に

$$T_c \approx C h^3 y'''(x), \quad C = -\frac{1}{12} \quad (1.8)$$

が成立ち、 T_c は h^3 に比例するところから、 $\varepsilon_2 \leq (\frac{1}{2})^3 \varepsilon_1$ によっておけば、刻み幅が2倍に変更された直後に半分にもなったり、半分に変更された直後に2倍にされる危険性が少ない。積分の出發時と刻み幅の変更時には、予測子 (1.3) はそのままの形で使用出来ないが、このときは何らかの手法 (例えば改良オイラー法で予測値 y_n を出し、 $T_c \approx -\frac{1}{3} D_n$ とするなど) で T_c を評価し、上記と同様に刻み幅の制御を行なうものとする。刻み幅が余りに小さくなり、ある正の微小量 δ に対し、 $h < \delta$ となったら計算は止める。

以上の方法によつて、文献[3]の「解内」を解いてみる例を次に示そう。

2. 例題

<例1> 刻み幅が徐々に縮小する例

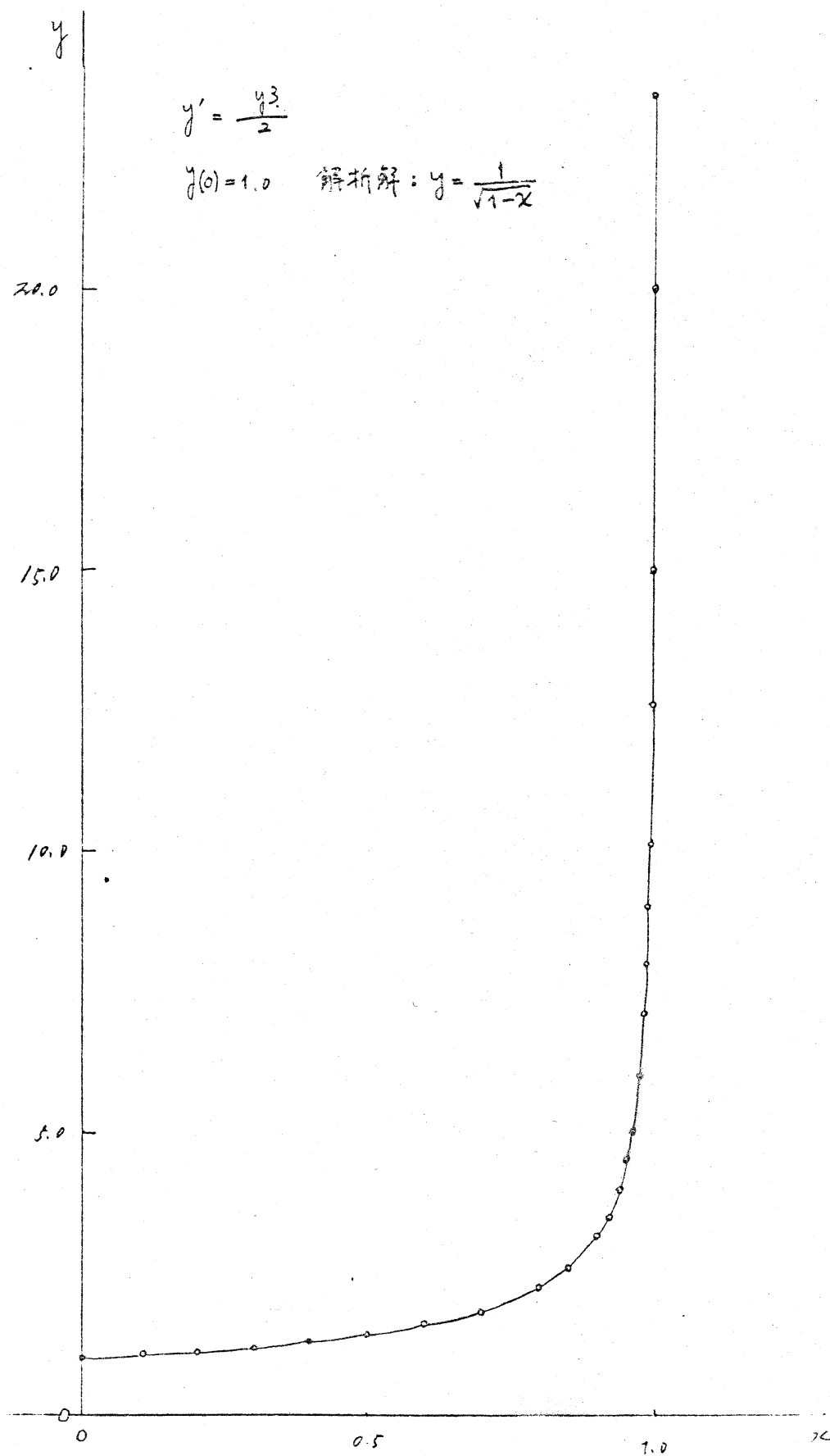
$$y' = \frac{1}{2} y^3, \quad y(0) = 1 \quad (2.1)$$

解析解は $y = (1-x)^{-\frac{1}{2}}$ であるから、 $x \geq 1$ では解は存在しないはずであるが、解法によつては（例えばEuler法） $x \geq 1$ の部分でも数値解が計算されることがあり、またMilne法では $x=1$ の近くで収束しにくくなるなどの現象が指摘されている（[3], D-16ページ）。図1図にTRAMによる数値解のグラフを示す。TRAMによつて(2.1)を解くと、 x_n は1に十分近づくが、1を越えることはない。誤差と刻み幅の変化の様子を図2図に示す。

<例2> 刻み幅が徐々に拡大する例

$$y' = y^6, \quad y(0) = -3 \quad (2.2)$$

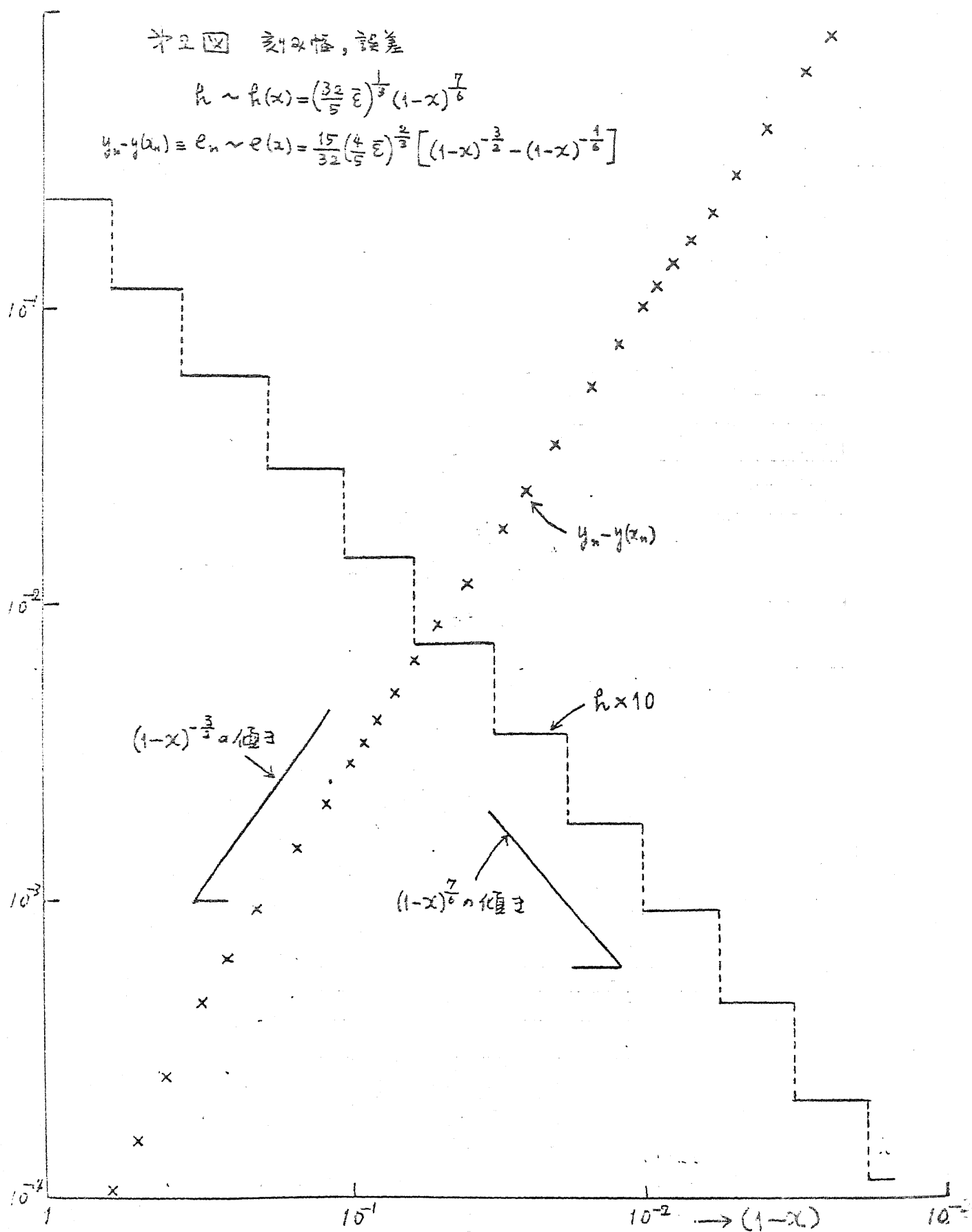
解析解は $y = -3(1+5 \cdot 3^5 x)^{-\frac{1}{5}}$ である。 $x \rightarrow \infty$ のとき $y \rightarrow 0$ であるが、積分公式の刻み幅をよほど慎重に選ばないと、数値解が発散してしまうことがある（[3], D-26, D-27ページ）。TRAMによる計算結果を図3図、図4図に示す。



※ 2 Ⅳ 変り幅, 誤差

$$h \sim h(x) = \left(\frac{32}{5} \varepsilon\right)^{\frac{1}{3}} (1-x)^{\frac{7}{6}}$$

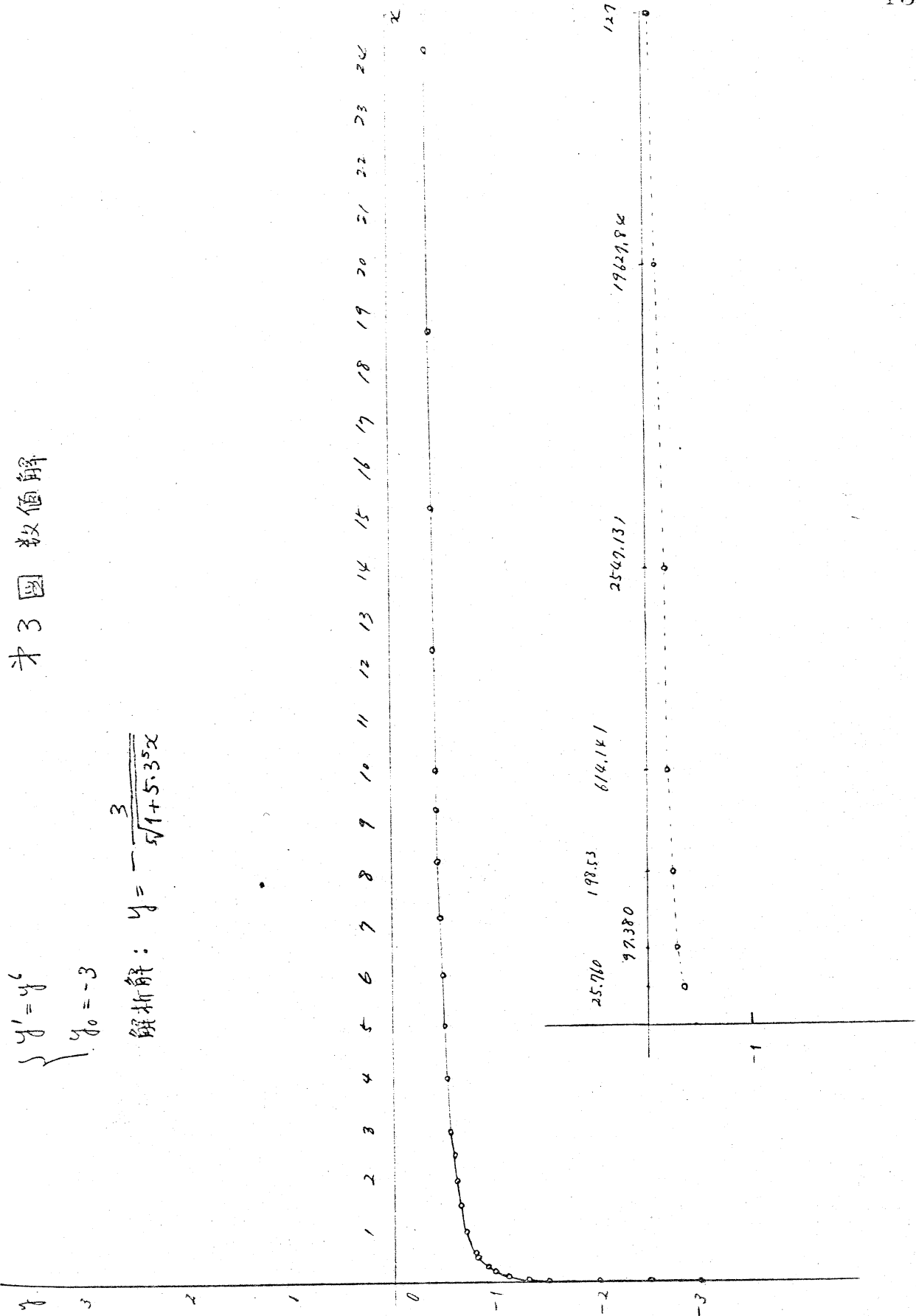
$$y_n - y(x_n) \equiv e_n \sim e(x) = \frac{15}{32} \left(\frac{4}{5} \varepsilon\right)^{\frac{2}{3}} \left[(1-x)^{-\frac{3}{2}} - (1-x)^{-\frac{1}{6}}\right]$$



才3 四 数值解

$$\begin{cases} y' = y^2 \\ y_0 = -3 \end{cases}$$

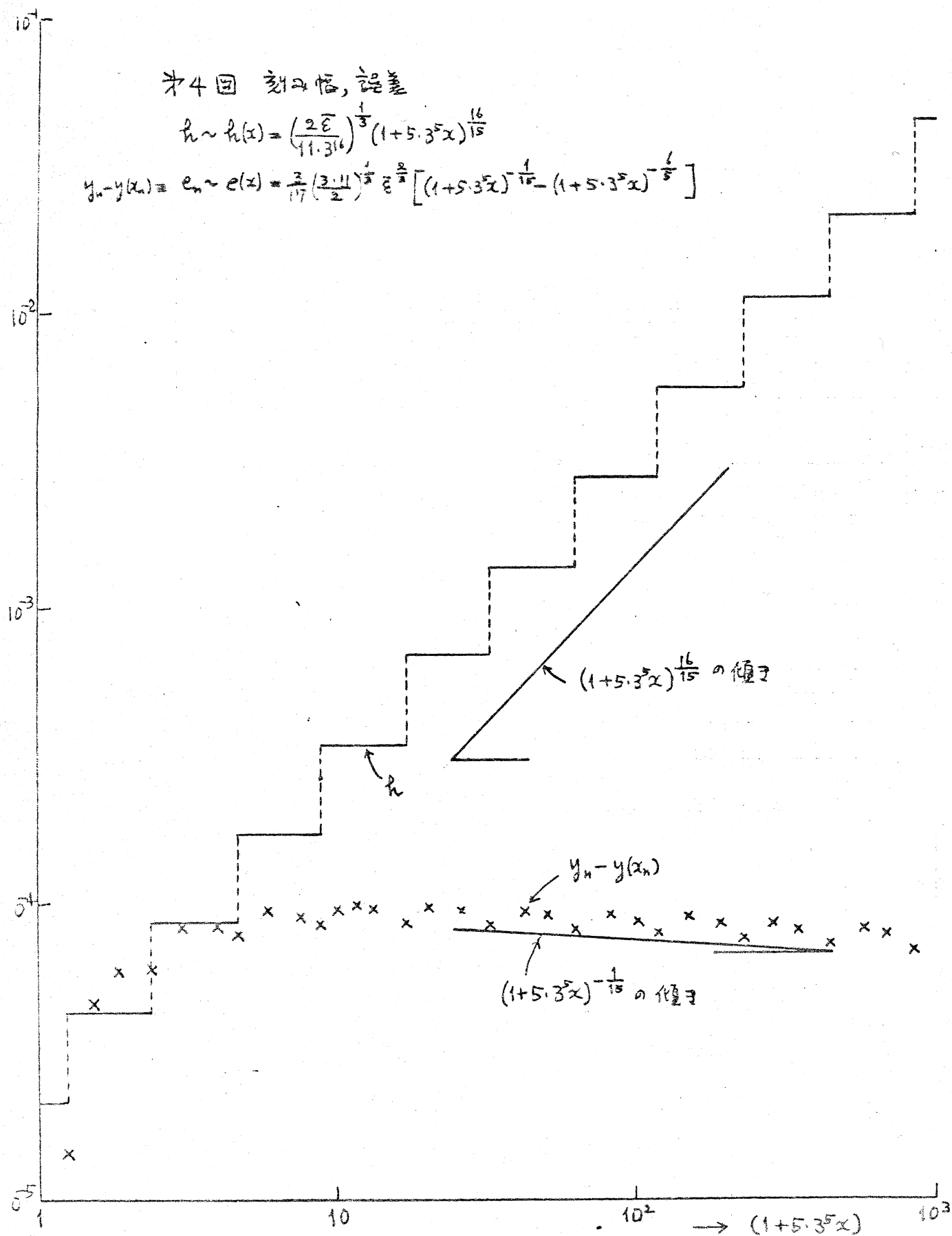
解析解: $y = -\frac{3}{\sqrt{1+5.3x}}$



※4回 刻幅, 誤差

$$h \sim h(x) = \left(\frac{2\varepsilon}{11 \cdot 3^6} \right)^{\frac{1}{3}} (1+5 \cdot 3^5 x)^{\frac{16}{15}}$$

$$y_n - y(x_n) = e_n \sim e(x) = \frac{2}{17} \left(\frac{3 \cdot 11}{2} \right)^{\frac{1}{3}} \varepsilon^{\frac{2}{3}} \left[(1+5 \cdot 3^5 x)^{-\frac{1}{15}} - (1+5 \cdot 3^5 x)^{-\frac{1}{5}} \right]$$



3. 漸近誤差理論による説明

さて、前節でみた刻み幅の変化、誤差の振舞いなどのように起るのがある。Henrici [2] の漸近誤差理論によって、大まかな性質をつかんでみよう。

数値解に含まれる打ち切誤差を

$$e_n = y_n - y(x_n) \quad (3.1)$$

で定義すると、刻み幅 h が十分小さいときには漸近的に

$$e_n \sim e(x) \quad (3.2)$$

と評価できる。ここには $e(x)$ は常微分方程式

$$\begin{cases} e' = f_y(x, y(x)) e + C h^2 y'''(x) \\ e(a) = 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

の解である。ところが、局所打ち切誤差の絶対値が何れ一定に保たれると考えると、(1.7), (1.8) より、 $\bar{\varepsilon}$ をある正の定数 ($\bar{\varepsilon}$ と ε の「平均的な」量と考えるとよいであろう) として

$$|C h^3 y'''(x)| \approx \bar{\varepsilon} \quad (3.4)$$

を得る。(3.4) より刻み幅は

$$h \approx h(x) = \bar{\varepsilon}^{\frac{1}{3}} |C y'''(x)|^{-\frac{1}{3}} \quad (3.5)$$

のように変化すると考えられる。今考えている x の区間内で y''' が符号を変えることがないと仮定すると、* (3.3), (3.5) *
* y''' の符号が変化する場合にはどこかで $y'''(x) = 0$ となるが、 x_n が $y'''(x) = 0$ を満たす x に近づくにつれて、 h は次第に拡大されると考えられる。このとき h が十分小さいという仮定は成立しなくなることがあるから、漸近理論が適用できるという保証はなくなってしまふ。

より

$$|e_n| \approx |e(x_n)| = u(x_n) \int_a^{x_n} [u(t)]^{-1} \varepsilon^{\frac{2}{3}} |C y'''(t)|^{\frac{1}{3}} dt \quad (3.6)$$

を得る. 2.2に

$$u(x) = \exp \int_a^x f_g(t, y(t)) dt \quad (3.7)$$

と書いた. <例1>および<例2>の場合について, (3.5), (3.6)を計算し, その主要項の値をそれぞれ2回および4回に書き添えてある. 上記の漸近理論的な説明が, 実例とかなりよく適合している様子が見えてくる.

4. 例題

<例2>のように刻み幅が拡大される場合には, どの程度の大きさの刻み幅で漸近理論の説明ができるだろうか. 与えられた微分方程式が $y' = -y$ の場合を例にとり数値実験を試みる.

<例3>

$$y' = -y, \quad y(0) = 1 \quad (4.1)$$

解析解は $y = e^{-x}$ であるから, 漸近理論が成立するとすると局所相対誤差は

$$T_e \approx Ch^3 y'''(x) = Ch^3 e^{-x} \quad (4.2)$$

と書ける. $|T_e|$ は x の単調減少函数であるから, 刻み幅を一定にしておいて積分を進めると $|T_e|$ が次第に小さくなり, と

ここで ε' に達し刻み幅の拡大が行われるであろう。刻み幅の拡大が行われる点を $X_1, X_2, \dots$ とし、はじめの刻み幅を h_0 、区間 $I_m = [X_m, X_{m+1}]$ での刻み幅を h_m とすると

$$\begin{cases} |Ch_m^3 y'''(X_{m+1})| = \varepsilon' & (4.3) \\ h_{m+1} = 2h_m & (4.4) \end{cases}$$

が成立つ。(4.3), (4.4) より

$$X_{m+1} - X_m = 3 \log 2 \quad (m=1, 2, \dots) \quad (4.5)$$

を得るが、(4.5) は刻み幅の拡大が一定の長さ $3 \log 2 \approx 2.1$ だけ積分が進むたびに起こることを示している。また h_m と

X_{m+1} は

$$h_m = 2^m h_0 = h_0 e^{\frac{1}{3}(X_{m+1} - X_1)} \quad (4.6)$$

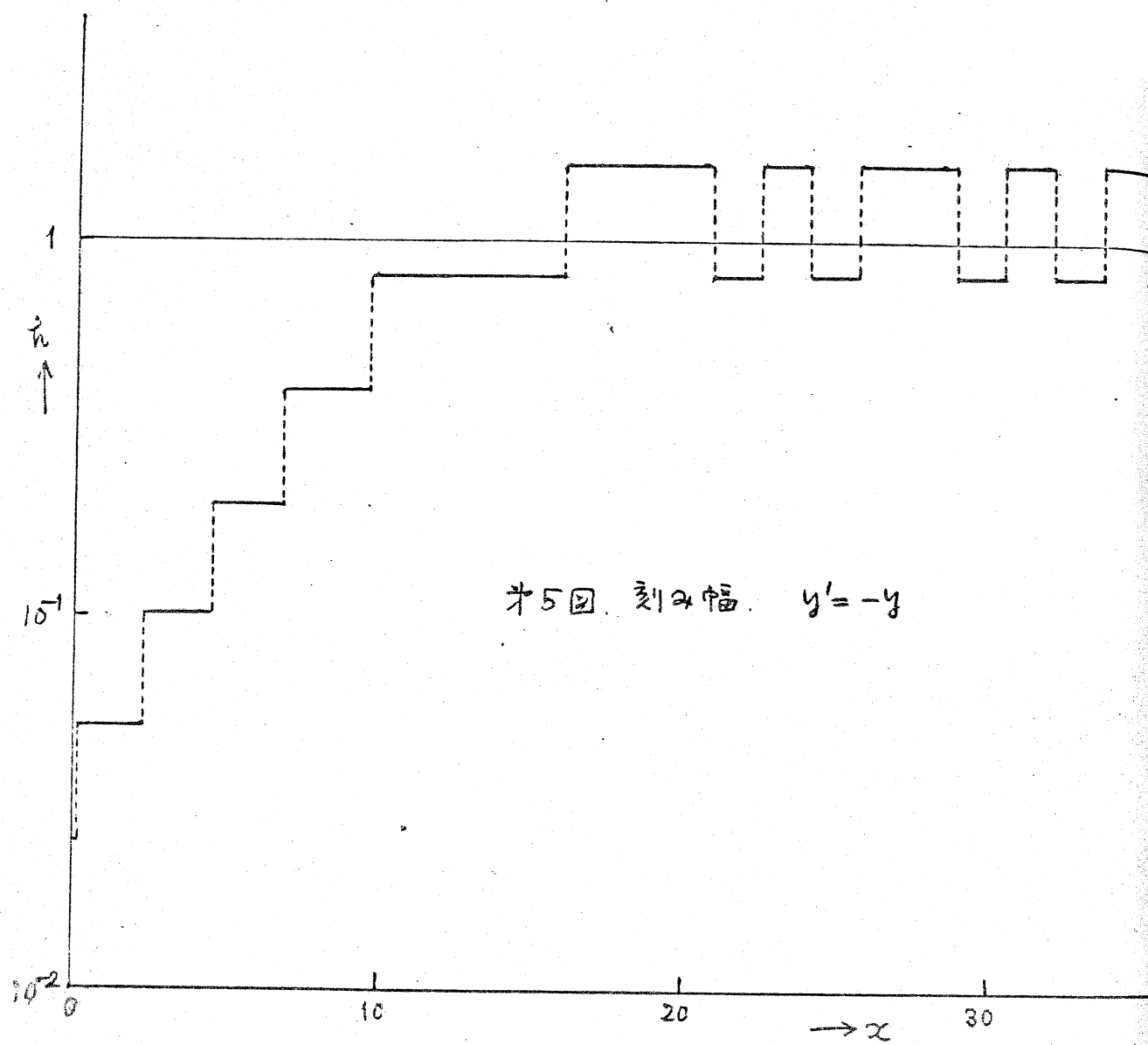
の関係が成す。(4.6) を確かめるために数値実験を行、その結果、図 5 図け得られた刻み幅の変化の様子を示すグラフである。

これによると $x \leq 10$ までによく (4.6) にあっているが、 $x > 10$ あたりから、刻み幅は $h=1$ の前後を振動している。

このあたりの状況は、いままでの漸進理論では説明できそうもない。つぎにこの現象の説明を試みよう。

5. 刻み幅の上限

前節の数値実験の結果によると、刻み幅の拡大が行われる場合でも上限がありそうである。微分方程式が $y' = -y$



の場合に則して、刻み幅の上限がどのように決まるかを考えよう。

微分方程式が (4.1) に与えられているときには、(1.3), (1.4) は次のように書ける。

$$\begin{cases} z_n = y_{n-2} - 2h y_{n-1} \end{cases} \quad (5.1)$$

$$\begin{cases} y_n = y_{n-1} - \frac{1}{2}h(z_n + y_{n-1}) \end{cases} \quad (5.2)$$

(5.1), (5.2) より数値解 y_n は、刻み幅 h の変化がないう範囲内で差分方程式

$$y_n = (1 - \frac{1}{2}h + h^2) y_{n-1} - \frac{1}{2}h y_{n-2} \quad (5.3)$$

によって、次々に定められてゆくことになる。修正量 D_n は

$$D_n \equiv y_n - z_n = (1 + \frac{3}{2}h + h^2) y_{n-1} - (1 + \frac{1}{2}h) y_{n-2} \quad (5.4)$$

と書けるから、(5.3) を考慮に入れ D_n の満たす差分方程式を求めると

$$D_n = (1 - \frac{1}{2}h + h^2) D_{n-1} - \frac{1}{2}h D_{n-2} \quad (5.5)$$

を得る。刻み幅 h が拡大されてある値を越えると、差分方程式 (5.5) の特性方程式

$$\varphi(\lambda) \equiv \lambda^2 - (1 - \frac{1}{2}h + h^2)\lambda + \frac{1}{2}h = 0 \quad (5.6)$$

の根の中に、絶対値が1を越えるものが存在する可能性がある。そうすると $|D_n|$ は複素数の経路について増加し、 $h=2$ から ε_1 を超えるので、刻み幅の縮小が行われることになる。TRAM はこのような自動制御を行うため、刻み幅の上限が存在

在する。 $\varphi(\lambda)=0$ のすべての根が1を越えない条件より、刻み幅の上限*

$$\epsilon \leq 1 \quad (5.7)$$

を得る。以上が第5図に与えられる刻み幅の振動現象の説明である。なお、微分方程式が(1.1)で与えられている場合には、(5.7)はおよそ

$$\epsilon |f_y| \leq 1 \quad (5.8)$$

のように書けると思われる。(5.8)の条件は、普通の反復型修正子の収束条件と対応しているし、また Collatz の「自然な」刻み幅([1], 89ページ)の条件とも対応している。

(5.8)から決まる ϵ の上限が、安心して数値解法を行なえる刻み幅のよりおりの上限であろう。 $|f_y|$ が非常に大きい方程式の場合には、刻み幅は十分小さくとらねばならないが、解析解が未知の場合には $|f_y|$ の大きさを知ることも難しく、このために種々の困難が生じることがある。文献[6], [7]の場合もこの例であろうと思われる。以上の点に關して言えるは自動的に(5.8)の条件を満たしてくれると思われる TRAM は良い解法の一つであると言えよう。

* ϵ が1を越えても、 $|D_n|$ が ϵ_1 を越えるまでは、その ϵ で積分が進められるので、厳密な意味では「上限」という語は当らない。

6. 例題

<例4> Van der Pol 方程式

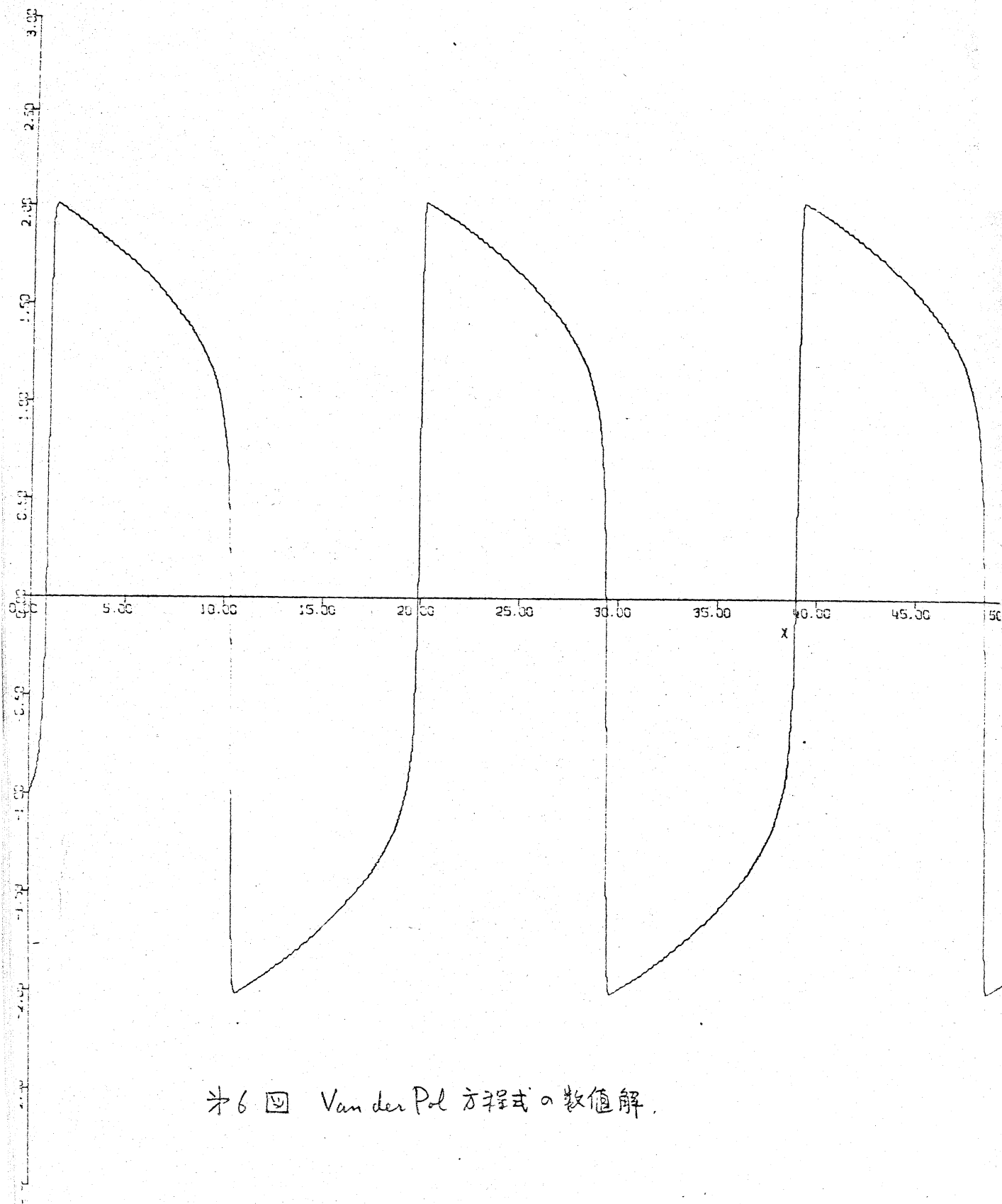
$$y'' + K(y^2 - 1)y' + y = 0 \quad (K=10), \quad y(0) = -1, \quad y'(0) = 0 \quad (6.1)$$

この方程式は非線型振動の代表的な例であるが、 $K \gg 1$ のときは1周期の間に y が急激な立上り、なだらかに下降、急激な落込み、なだらかな上昇をするいわゆる弛張振動を示す。したがって刻み幅は、 y の変化の急所と急所では非常に小さくなければならぬし、変化のゆるやかなところでは十分に拡大されなければならぬ。また y の振幅は1附近であるが、 y が1と2の間にあるときは y の変化は非常に小さく、このとき (6.1) を近似的に線型とみると、線型方程式とみなすの固有値には固有絶対値の非常に大きい (K 程度) のものが存在する。したがって、前節で述べたように、刻み幅の上限は約 $1/K$ となるであろう。

(6.1) を1階の連立微分方程式

$$\begin{cases} y' = z, & y(0) = -1 \\ z' = -K(y^2 - 1)z - y, & z(0) = 0 \end{cases} \quad (6.2)$$

として、TRAM で解いた結果を Fig. 6 に示す。 $1 < y < 2$ の刻み幅は $0.0625 \sim 0.125$ で約 $1/K = 0.1$ の近くであった。



※6 ④ Van der Pol 方程式の数値解.

7. 補足

7.1 最適刻み幅について

ある区間の誤差を与えておいて、その中で積分するのによ
する分点の数を最少にする刻み幅の決定、あるいは分点の数を
与えて、誤差を最少にする刻み幅を求める問題については
ある程度研究がなされているが ([8], [9]), (1.1) の右辺
 $f(x, y)$ が x のみの関数であるときは、局所打ち切り誤差を一定にする
積分公式が最適であるとの結論が得られている。

7.2 独立変数の変換と刻み幅自動調節との関係について

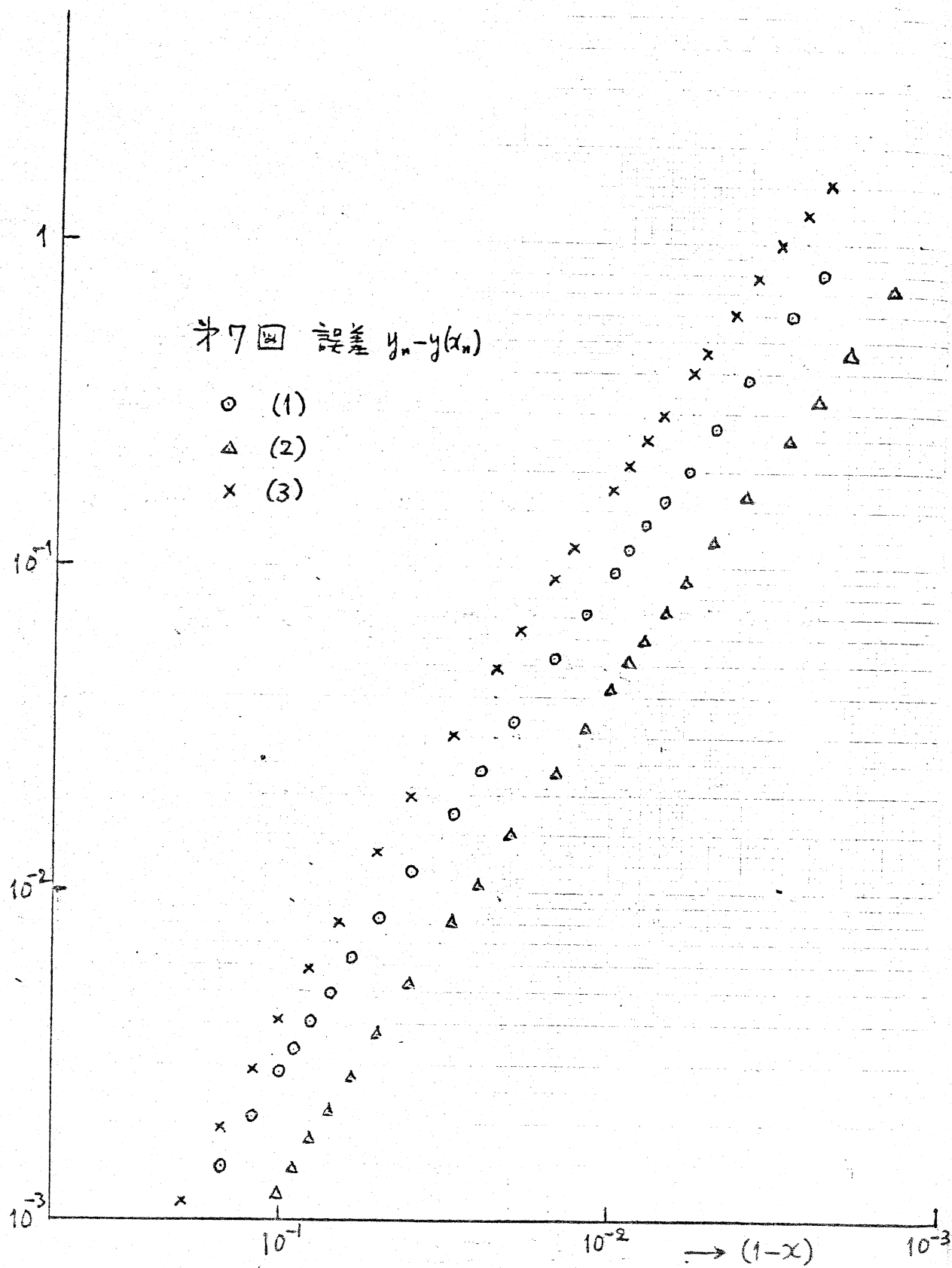
第7図は〈例1〉を次の3通りの方程式に変換して、いす
れも TRAM で解いた際の y の誤差 $y_n - y(x_n)$ をプロットした
ものである。

$$(1) \quad \frac{dy}{dx} = \frac{1}{2} y^3, \quad y(0) = 1 \quad (\text{〈例1〉と同じ}) \quad (7.1)$$

$$(2) \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt} = \frac{2}{3} y^{-2}, & x(0) = 0 \\ \frac{dy}{dt} = \frac{1}{3} y, & y(0) = 1 \end{cases} \quad (7.2)$$

$$(3) \quad \frac{dx}{dy} = 2y^{-3}, \quad x(1) = 0 \quad ((1) \text{ の逆函数表す}) \quad (7.3)$$

誤差のグラフが (1), (2), (3) のいずれも非常に似た性質を
示していることは、局所打ち切り誤差一定の制御を行う解法が解
曲線へおよぼす誤差の影響は独立変数のとり方に依存しない
ことを示唆しているように思える。もしこのことが一般的に
成立つならば実用的な見地からは、相当意義深いことと思わ



れる。今後さらに検討を加えてみたい。

あとがき

TRAM という一つの解法を具体例に適用することによって、刻み幅の自動調節の意味や性格をいくらかでも理解してみたが、た。丸め誤差の検討、微分方程式の多元化など残されている問題は非常に多いが、これから少しずつ検討していきたいと思います。

最後に、この小論をまとめるにあたり、終始懇切な御助言、御指導をいただいた東京大学の森口繁一教授に心から感謝いたします。また、数値実験にさいしては東京大学工学部計数工学科細川晃生君および本多房子嬢の御協力を得ました。記して謝意を表します。

参考文献

- [1] L. Collatz: The Numerical Treatment of Differential Equations. Springer-Verlag, 1966.
- [2] P. Henrici: Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations, Wiley, 1962.
- [3] 清水厚次郎: 常微分方程式の数値解法における数学的諸問題. オク回プログラミングシンポジウム報告集, 1966, pp. D-15 ~ D-27.
- [4] 森口, 伊理, 小林: 常微分方程式の数値解法における難問対策への取り組み. オク回プログラミングシンポジウム報告集, 1967, pp. B-28 ~ B-39.

- [5] 伊理正夫: 予測子・修正子法により常微分方程式の初期値問題を解く際の局所打ち切誤差の評価をするためのいわゆる Milne の方法について. 昭和39年度第5回情報処理学会講演予稿集, pp. 59~60.
- [6] 川合敏雄: 大きい固有値の混入している微分方程式の数値解法. 数理科学総合研究才2, 3, 4班合同シンポジウム予稿, 1960, pp. 67~74.
- [7] 神沼靖子: 常微分方程式の数値解. 第8回プログラミング・シンポジウム報告集, 1967, pp. B-12~B-14.
- [8] D. Morrison: Optimal Mesh Size in the Numerical Integration of an Ordinary Differential Equation. JACM, 9 (1962), pp. 98~103.
- [9] H. Greenspan, W. Hafner, & M. Rebane: On Varying Stepsize in Numerical Integration of First Order Differential Equations. Numerische Mathematik, 7 (1965), pp. 286~291.